14.2 산란 파동함수의 적분 표현 (Integral equation for scattering)

• 헬름홀쯔 방정식과 그린함수 (Helmholtz equation and Green's function)

시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식을

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi + V\psi = E\psi$$

다음과 같이 다시 쓰고

$$\vec{\nabla}^2\psi + k^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}V\psi, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{----------} \ (2.1)$$

위식의 우변을 새로운 함수로 다음과 같이 정의한다.

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{x})\,\psi(\vec{x}) \equiv Q(\vec{x}) \quad \text{--------} \ (2.2)$$

이제 함수 $G(\vec{x})$ 가 다음의 헬름홀쯔 방정식(Helmholtz equation)을 만족한다고 하자.

$$(\vec{\nabla}_x^2 + k^2)\,G(\vec{x}) = \delta^3(\vec{x}) \quad \text{-------------} \ (2.3)$$

그러면 (2.1)식을 만족하는 파동함수는 다음과 같이 주어진다.

$$\psi(\vec{x}) = \int G(\vec{x}-\vec{x}')\,Q(\vec{x}')\,d^3\vec{x}' \quad \text{------------} \ (2.4)$$

이에 대한 증명은 (2.4)식을 (2.3)식에 대입하여 다음과 같이 보일 수 있다.

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x}) + k^2\psi(\vec{x}) &= (\vec{\nabla}_x^2 + k^2)\int G(\vec{x}-\vec{x}')Q(\vec{x}')\,d^3\vec{x}' \\ &= \int d^3\vec{x}'\,Q(\vec{x}')\,(\vec{\nabla}_x^2 + k^2)\,G(\vec{x}-\vec{x}') \\ &= \int d^3\vec{x}'\,Q(\vec{x}')\,\delta^3(\vec{x}-\vec{x}') = Q(\vec{x}) \qquad \blacksquare\end{aligned}$$

이상과 같은 역할을 하는 함수 $G(\vec{x})$ 를 우리는 통상 그린함수(Green's function)라고 한다. 이는 헬름홀쯔 방정식 즉 (2.3)식을 만족하는 그린 함수를 구하게 되면 슈뢰딩거 방정식을 만족하는 파동함수를 구할 수 있음을 보여준다.

▶ 경로적분에 의한 그린함수의 계산 ◀
(Evaluating the Green's function via contour integral)

이제 그린함수를 구하기 위하여 그린함수를 푸리에 변환 형태로 다음과 같이 써보자.

$$G(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int e^{i\vec{s}\cdot\vec{x}}\,g(\vec{s})\,d^3\vec{s} \quad \text{-----------} \ (2.5)$$

이를 (2.3)식의 좌변에 대입하면 다음의 결과를 얻는다.

$$\begin{aligned}(\vec{\nabla}_x^2 + k^2)\,G(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\left[(\vec{\nabla}_x^2 + k^2)\,e^{i\vec{s}\cdot\vec{x}}\right]g(\vec{s})\,d^3\vec{s} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\left[(-s^2 + k^2)\,e^{i\vec{s}\cdot\vec{x}}\right]g(\vec{s})\,d^3\vec{s}\end{aligned}$$

한편 (2.3)식의 우변인 델타함수는 다음과 같이 쓸 수 있으므로

$$\delta^3(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{s} \;\; e^{i\vec{s}\cdot\vec{x}}$$

우리는 양변을 비교하여 다음의 결과를 얻는다.

$$g(s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 - s^2}$$

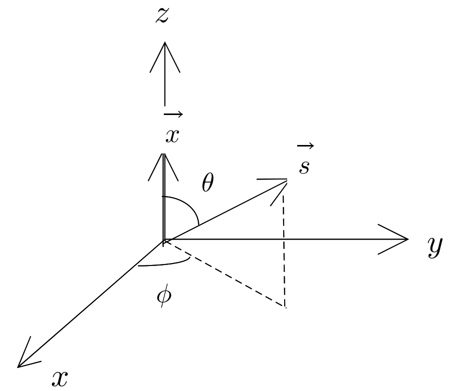
그러므로 (2.5)식의 그린함수는 다음과 같이 주어진다.

$$\boxed{G(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{s}\cdot\vec{x}} \frac{1}{k^2 - s^2} d^3\vec{s}} \qquad \text{--------} \quad (2.6)$$

이제 위에 주어진 그린함수를 구면좌표계에서 적분하여 보자.

적분의 편의를 위하여 $\vec{x}$ 의 방향을 z 축으로 잡고 $\vec{s}$ 는 $\vec{x}$ 와 θ 의 각도를 가지며 그 방위각은 ϕ 라고 하자.

$$\begin{aligned} G(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{\infty} s^2 ds \, \frac{e^{isr\cos\theta}}{k^2 - s^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} ds \frac{s^2}{k^2 - s^2} \int_0^{\pi} d\theta \, \sin\theta \; e^{isr\cos\theta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} ds \, \frac{s^2}{k^2 - s^2} \, \frac{2\sin(sr)}{sr} \end{aligned}$$



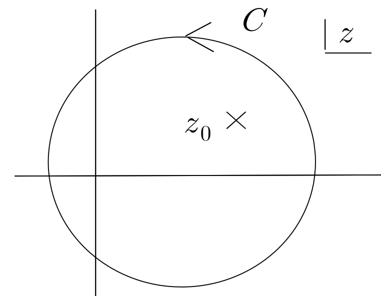
[그림4] 구면좌표계에서 $\vec{x}$ 및 $\vec{s}$

위 함수는 이제 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} G(\vec{x}) &= \frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} ds \; \frac{s\sin(sr)}{k^2 - s^2} \\ &= \frac{i}{8\pi^2 r} \left[\int_{-\infty}^{\infty} ds \, \frac{s\,e^{isr}}{s^2 - k^2} - \int_{-\infty}^{\infty} ds \; \frac{s\,e^{-isr}}{s^2 - k^2} \right] \end{aligned} \qquad \text{-------} \quad (2.7)$$

위식의 마지막 줄에서의 적분은 복소평면에서의 경로 적분(contour integral)으로 표시하면 쉽게 구할 수 있다. 먼저 코시의 적분 정리(Cauchy's integral formula)는 함수 $f(z)$가 복소평면 상의 닫힌 경로 C 와 그 내부에서 미분 가능하다고 할 때 다음과 같이 주어진다.

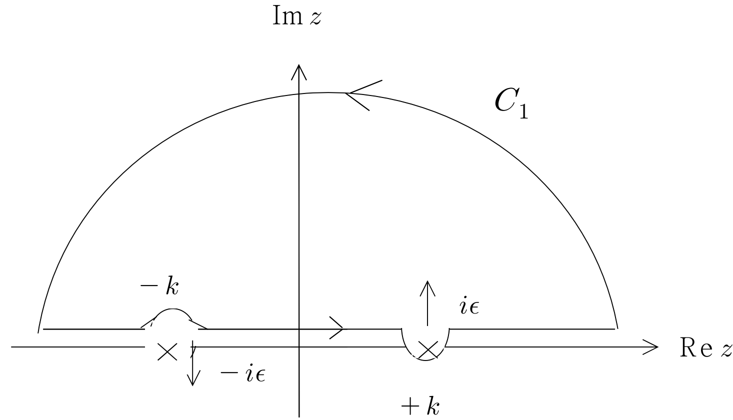
$$\oint_C \frac{f(z)}{(z - z_0)} dz = 2\pi i \, f(z_0) \qquad \text{------} \; (2.8)$$



[그림5] 복소평면 상에서의 적분:
닫힌 경로 C 와 특이점 z_0

그러므로 위의 실수축 위에서의 첫 번째 적분은 다음과 같이 복소평면 상의 경로 C_1에 대한 적분으로 바꿀 수 있다. ([그림6] 참조)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{s\, e^{isr}}{(s+k)(s-k)} ds \; = \oint_{C_1} \frac{z\, e^{irz}/(z+k)}{(z-k)} dz$$



[그림6] 실수축 위에서의 적분을 복소평면 상의 적분으로 변환

여기서 실제

$$\oint_{C_1} \frac{z\,e^{irz}/(z+k)}{(z-k)}dz = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{s\,e^{isr}}{(s+k)(s-k)}ds + \int_{C_{|z|\to\infty}} dz\,\frac{z\,e^{irz}/(z+k)}{(z-k)}$$

이다. 위의 두 번째 항은 C_1 경로에서 위쪽 반원을 따라가는 경로 적분으로 $\mathrm{Im}\,z \to +\infty$ 가 될 때 $e^{irz} \to 0$ 이 되므로 여기서는 아래쪽 반원이 아닌 위쪽 반원으로 경로를 택한 것이다. 그리하여 Jordan의 렘마에 의하여 이 부분의 적분값은 0 이 된다. 여기서 경로 C_1 은 $z=k$ 에서의 특이점을 포함하지만, $z=-k$ 에서의 특이점은 포함하지 않도록 잡았음에 유의하자. 이는 $z=\pm k$ 에서의 특이점은 각각 $z=k$ 에서 $i\epsilon$ 만큼 올려서 $z=k+i\epsilon$ 으로, 따라서 $z=-k$ 에서는 $z=-k-i\epsilon$ 으로 $i\epsilon$ 만큼 내려서 계산하였다. 이제 코시의 적분 정리(2.8)식에서 우리는 다음과 같은 첫 번째 적분값을 얻는다.

$$\lim_{\epsilon\to 0}\oint_{C_1} \frac{z\,e^{irz}/(z+k+i\epsilon)}{(z-k-i\epsilon)}dz = \lim_{\epsilon\to 0} 2\pi i\,\left.\frac{z\,e^{irz}}{z+k+i\epsilon}\right|_{z=k+i\epsilon} = i\,\pi\,e^{ikr}$$

두 번째 적분의 경우은 다음과 같이 복소평면 상의 경로적분으로 변환하여 한다.

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{s\,e^{-isr}}{(s+k)(s-k)}ds = \oint_{C_2} \frac{z\,e^{-irz}/(z-k)}{(z+k)}dz$$

여기서 경로 C_2 는 실수축은 [그림6]과 반대로 $+\infty$ 에서 $-\infty$ 로, 그리고 반원 부분은 복소평면의 아래 부분에서 역시 시계반대 방향으로 향한다. 이 경우에는 특이점 $z=-k$ 가 경로 내부에 포함되므로 그 적분값은 다음과 같다.

$$\oint_{C_2} \frac{z\,e^{-irz}/(z-k)}{(z+k)}dz = 2\pi i\,\left.\frac{z\,e^{-irz}}{z-k}\right|_{z=-k} = i\,\pi\,e^{ikr}$$

그러므로 (2.7)식으로부터 그린함수는 다음과 같이 됨을 알 수 있다.

$$G(\vec{x}) = \frac{i}{8\pi^2 r} \times 2i\pi e^{ikr} = -\frac{1}{4\pi|\vec{x}|} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}} \quad \text{--------} \; (2.9)$$

위에서 우리는 $\vec{k}'$ 을 다음과 같이 놓았음에 유의하자.

$$\vec{k}' \equiv k \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} \quad \text{--------} \quad (2.10)$$

이제 (2.4)식에 (2.2)식과 그린함수 (2.9)식을 대입하면 슈뢰딩거 방정식 (2.1)식을 만족하는 다음의 파동함수를 얻는다.

$$\psi(\vec{x}) = \int G(\vec{x}-\vec{x}')\, Q(\vec{x}')\, d^3\vec{x}'$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{x}' \, \frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}') \quad \text{-------} \; (2.11)$$

여기서 한 가지 주목할 점은 자유입자 해를 위에서 얻은 해에 추가하여도 원래의 슈뢰딩거 방정식을 만족한다는 것이다. 자유입자의 경우 $V=0$ 이므로 (2.1)식은 다음과 같이 된다.

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\, \psi_0 = 0$$

그리고 이와 연관된 그린함수는 다음의 관계식으로 표현할 수 있을 것이다.

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\, G_0 = 0$$

이제 자유입자 해를 추가한 파동함수를 $\tilde{\psi}$ 로 기술하자.

$$\tilde{\psi}(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \psi(\vec{x})$$

이 파동함수가 슈뢰딩거 방정식의 해라면 다음의 관계식이 만족되어야 할 것이다.

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\, \tilde{\psi}(\vec{x}) = \tilde{Q}(\vec{x}), \quad \tilde{Q}(\vec{x}) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x})\, \tilde{\psi}(\vec{x})$$

이제 위 관계를 증명하기 위하여 새로운 파동함수를 그린함수로 표시하자.

$$\tilde{\psi}(\vec{x}) = \int \left[G(\vec{x}-\vec{x}') + G_0(\vec{x}-\vec{x}') \right] \tilde{Q}(\vec{x}')\, d^3\vec{x}'$$

위에서 $\psi_0(\vec{x}) = \int G_0(\vec{x}-\vec{x}')\, \tilde{Q}(\vec{x}')\, d^3\vec{x}'$ 가 만족된다. 그러면 다음과 같이 되어

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\, \tilde{\psi}(\vec{x}) = \int (\vec{\nabla}^2 + k^2) \left[G(\vec{x}-\vec{x}') + G_0(\vec{x}-\vec{x}') \right] \tilde{Q}(\vec{x}')\, d^3\vec{x}'$$

$$= \int \left[\delta^3(\vec{x}-\vec{x}') + 0 \right] \tilde{Q}(\vec{x}')\, d^3\vec{x}' = \tilde{Q}(\vec{x})$$

증명이 된다. 그러므로 슈뢰딩거 방정식의 일반해는 최종적으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\boxed{\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{x}' \, \frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}')} \quad \text{------} \; (2.12)$$

위식은 산란 파동함수에 대한 적분 방정식이며, 여기서 자유입자 평면파 해의 파수벡터는 $\vec{k}$ 로 표시했고, $\vec{k}' = k \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} \equiv k\,\hat{x}$ 은 산란된 파동의 파수벡터에 해당한다.

만약 (2.12)식의 파동함수가 입사파를 포함하는 산란된 파동함수라고 하고 산란 과정에 작용하는 위치에너지 $V(\vec{x}')$가 제한된 영역에서만 작용한다고 하면 다음의 조건을 만족할 것이다.

$$V(\vec{x}') \neq 0 \ , \ |\vec{x}'| \ll |\vec{x}|$$

이제 조건 $|\vec{x}'| \ll |\vec{x}| = r$ 이 만족되면 다음의 관계식이 성립한다.

$$|\vec{x} - \vec{x}'|^2 = |\vec{x}|^2 + |\vec{x}'|^2 - 2\vec{x} \bullet \vec{x}' \cong |\vec{x}|^2 \left(1 - \frac{2\vec{x} \bullet \vec{x}'}{r^2}\right)$$

즉, $|\vec{x} - \vec{x}'| \cong |\vec{x}| \left(1 - \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^2}\right) = r - \hat{x} \cdot \vec{x}'$ 이 되어 (2.12)식의 피적분 함수 중 일부를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \cong \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}} \quad e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}}{r - \hat{x} \cdot \vec{x}'} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}$$

위에서 우리는 $\vec{k}' \cdot \vec{x} = k\,\hat{x} \bullet \vec{x} = kr$ 의 관계를 이용하였다. 이제 입사파가 $+z$ 방향으로 진행한다고 가정하면 $\vec{k} = k\,\hat{z}$ 가 되어 위의 조건들이 성립한다고 하면 산란된 파동함수는 (2.12)식으로부터 다음과 같이 주어진다.

$$\psi(\vec{x}) \simeq e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} \, V(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}')\, d^3\vec{x}' \ , \quad \vec{k}' = k\,\hat{x} \quad \text{-- (2.13)}$$

한편 (2.13)식을 (1.3)식과 비교하면 산란의 미분단면적을 기술하는 산란 진폭 $f(\theta)$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} \, V(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}')\, d^3\vec{x}' \quad \text{------- (2.14)}$$

14.3 보른 어림 (The Born approximation)

• 1차 보른 어림 (The first Born approximation)

이제 (2.12)식의 산란 파동함수에 대한 적분 표현에서 파동함수를 일차적으로 평면파로 근사하면 산란 진폭 (2.14)식에서의 파동함수 ψ 는 다음과 같이 쓸 수 있을 것이다.

$$\psi(\vec{x}') \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}$$

이러한 근사를 1차 보른 어림(the first Born approximation)이라고 하며, 이 경우 (2.14)식의 산란 진폭을 1차 보른 진폭(first-order Born amplitude)이라고 하며 $f^{(1)}$ 으로 표시한다.

$$f^{(1)}(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'}\, V(\vec{x}')\, d^3\vec{x}' \qquad \text{--------} \quad (2.15)$$

한편 1차 보른 어림에 의해 얻은 새로운 파동함수를 (2.12)식의 둘째 항에 대입하여 계산하면 2차 보른 어림에 해당하게 된다. 이러한 과정을 반복하여 고차의 보른 어림에 의한 파동함수도 구할 수 있으나 여기서는 1차 보른 어림까지만 고려하도록 하고 $f^{(1)}$ 에서의 지수 (1) 도 생략하도록 하겠다.

이제 1차 보른 진폭의 조금 더 구체적인 표현을 구해보자. 먼저 편의상 입사 파수벡터와 산란 파수벡터의 차이를 다음과 같이 놓자.

$$\vec{k}-\vec{k}' \equiv \vec{\kappa}$$

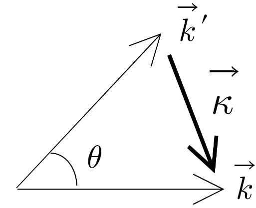
그러면 피적분 함수의 지수 부분은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}' = \kappa\, r'\cos\theta\ ,\quad |\vec{x}'| = r',\ |\vec{\kappa}| = \kappa$$

여기서 θ 는 입사 파수벡터 $\vec{k}$ 와 산란 파수벡터 $\vec{k}'$ 사이의 각이며

$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k$ 이므로 여기서 $\kappa = 2k\sin\frac{\theta}{2}$ 가 된다.

이제 산란에 작용하는 위치에너지가 산란 표적의 중심에서의 거리 즉 r' 에만 의존하는 $V(\vec{x}') = V(r')$ 의 경우를 가정하자. 이 경우 (2.15)식은 다음과 같이 된다.



[그림7] 입사 파수벡터와 산란 파수벡터

$$f(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\kappa r'\cos\theta'}V(r')r'^2\sin\theta' dr' d\theta' d\phi'$$
$$= -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^\infty r'^2\, V(r')dr'\int_0^\pi \sin\theta' d\theta'\ e^{i\kappa r'\cos\theta'}$$

여기서 $\int_0^\pi \sin\theta' d\theta'\ e^{i\kappa r'\cos\theta'} = \frac{e^{i\kappa r'} - e^{-i\kappa r'}}{i\kappa r'} = \frac{2\sin\kappa r'}{\kappa r'}$ 이므로 1차 보른 어림에서의 산란 진폭은 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2\kappa}\int_0^\infty r'\, V(r')\sin\kappa r'\, dr'} \qquad \text{--------} \quad (2.16)$$

• 유가와 산란과 러더퍼드 산란 (Yukawa scattering and Rutherford scattering)

이제 위치에너지가 다음의 유가와 퍼텐셜(Yukawa potential)로

$$V(r) = V_0\frac{e^{-\mu r}}{r} \qquad \text{-------------} \quad (2.17)$$

주어지는 경우의 산란을 1차 보른 어림으로 구해보도록 하자. 이 경우 (2.16)식에 의한 산란 진폭은 다음과 같이 된다.

$$f(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2\kappa}\int_0^\infty e^{-\mu r}\sin(\kappa r)\, dr$$

여기서 적분을 $I \equiv \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(\kappa r) dr$ 로 놓으면 부분 적분에 의해서 다음의 관계가 성립함을 알 수 있다.

$$I = \frac{\kappa}{\mu^2} - \frac{\kappa^2}{\mu^2} \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(\kappa r) dr$$

즉 $I = \dfrac{\kappa}{\mu^2 + \kappa^2}$ 를 얻는다.

그러므로 유가와 퍼텐셜의 경우 1차 보른 어림에 의한 산란 진폭은 다음과 같고

$$f(\theta) = -\frac{2m V_0}{\hbar^2 \kappa} \frac{\kappa}{\mu^2 + \kappa^2} = -\frac{2 m V_0}{\hbar^2 (\mu^2 + \kappa^2)} , \qquad \text{---------} \quad (2.18)$$

$\kappa = 2k \sin\dfrac{\theta}{2}$ 의 관계를 사용하면 미분 산란 단면적 $\dfrac{d\sigma}{d\Omega}$ 는 (1.2)식으로부터 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{2 m V_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{[2 k^2 (1 - \cos\theta) + \mu^2]^2} \qquad \text{-------} \ (2.19)$$

위에서 우리는 $\kappa^2 = 4k^2 \sin^2\dfrac{\theta}{2} = 2k^2(1 - \cos\theta)$ 의 관계를 사용하였다.

이제 유가와 퍼텐셜에서 $\mu \rightarrow 0$ 가 되고, $V_0 = q_1 q_2$ 가 되면 전하가 q_1 과 q_2 인 두 전하를 띤 입자들 사이의 쿨롱 산란이 된다. 이 경우 m 은 두 입자의 환산질량(reduced mass)이 된다. 이러한 쿨롱 퍼텐셜에 의한 두 원자핵 사이의 산란은 러더퍼드(Rutherford)에 의하여 측정되고 계산되었다. 러더퍼드 산란의 경우 표적 원자핵이 입사 원자핵에 비해 매우 무겁다고 생각하면 m 은 대략 입사 입자의 질량이 되고, 미분 산란 단면적은 위에 언급한 조건을 적용하면 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2 m q_1 q_2}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{[2 k^2 (1 - \cos\theta)]^2} = \left(\frac{q_1 q_2}{4E \sin^2\frac{\theta}{2}}\right)^2 \qquad \text{-----} \ (2.20)$$

위에서 E 는 입사 입자의 에너지이며 우리는 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ 의 관계를 적용하였다. 이 공식은 러더퍼드가 얻은 산란 공식과 정확히 일치함을 보여준다.
